

В. И. Ракун

СВОБОДНАЯ
ФОРМА
КРИСТАЛЛОВ



Российская академия наук
Уральское отделение Российской академии наук
Институт геологии им. академика Н.П. Юшкина ФИЦ Коми НЦ УрО РАН

В.И. Ракин

Свободная форма кристаллов

Екатеринбург
2021

УДК 548.54: 549.21
Р 191

Рецензенты:

доктор геолого-минералогических наук, профессор **В.А. Попов**,
главный научный сотрудник Института минералогии ЮУ ФНЦ МиГ УрО РАН
кандидат геолого-минералогических наук **Н.Н. Пискунова**,
старший научный сотрудник Института геологии им. Н.П.Юшкина ФИЦ Коми НЦ УрО РАН

Ракин В.И.

Р 191 Свободная форма кристаллов. — Екатеринбург: УрО РАН, 2021. — 328 с.
ISBN 978-5-7691-2543-0

Дано теоретическое описание свободной формы макрокристалла с позиций равновесной и неравновесной термодинамики. Для стационарного режима роста и растворения получены уравнения, определяющие геометрию кристаллов-многогранников. Разработана иерархическая адсорбционно-флуктуационная модель роста кристалла, позволяющая преодолеть интервал масштабов от атомарных процессов роста до макроскопических. Установлена граница применимости равновесных представлений для описания системы «кристалл — среда». Особое внимание уделено закономерностям изменения формы кристалла в условиях диссимметрии внешнего окружения, включающей и гравитационное поле. Уточнены формы реализации принципа симметрии Кюри для открытой стационарной системы. Дано описание эволюции формы природных алмазов и кварца. Предложен вариант решения проблемы структуры мантийной полиминеральной породы.

Книга рассчитана на кристаллографов, минералогов и специалистов по физике минералов.

Табл. 20. Ил. 74. Библиогр. 163.

A theoretical description of the free form of a macrocrystal from the equilibrium and nonequilibrium thermodynamics is given. The equations defining the geometry of polyhedron crystals have been obtained for the steady-state growth and dissolution regime. We have developed a hierarchical adsorption-fluctuation model of crystal growth that allows overcoming the interval of scales from atomic growth processes to macroscopic ones. The limit of applicability of equilibrium representations to the description of the «crystal-environment» system is established. Particular attention is paid to the regularities of crystal shape changes under conditions of external environment dissymmetry including the gravitational field. The forms of realization of the Curie symmetry principle for an open stationary system are clarified. The evolution of the form of natural diamonds and quartz is described. A variant solution of the mantle polymineral rock structure problem is proposed.

The book is intended for crystallographers, mineralogists and specialists in mineral physics.

Tab. 20. fig. 74. Bibliography 163.

© Уральское отделение РАН, 2021

© В.И. Ракин, 2021

© Институт геологии ФИЦ Коми НЦ
УрО РАН, 2021

ISBN 978-5-7691-2543-0

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
Глава 1. ТЕРМОДИНАМИКА И ФОРМА КРИСТАЛЛА	9
1.1. Равновесное термодинамическое описание формы кристалла	9
1.2. Теорема Вульфа о равновесной форме кристалла	16
1.3. Предположение о локальном термодинамическом равновесии	17
1.4. Предельные принципы неравновесной термодинамики	20
1.4.1. Принцип Онзагера	20
1.4.2. Обобщенный принцип Дьярмати	21
1.4.3. Принцип Пригожина	23
1.4.4. Принцип Циглера	24
1.5. Поверхность растущего кристалла в условиях минимума производства энтропии	27
1.5.1. Поведение пограничного слоя при переходе от растворения к росту кристалла	28
1.5.2. Открытая термодинамическая система	30
1.5.3. Динамическая стационарная форма макрокристалла	35
1.5.4. Стационарная форма макрокристалла в анизотропных условиях роста	38
ГЛАВА 2. МОРФОМЕТРИЯ ПОЛЯРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ФОРМЫ МАКРОКРИСТАЛЛОВ	42
2.1. Параболический гониометр	43
2.2. Градусные сетки для гномонической проекции	45
2.3. Диагностика рефлексов на параболическом гониометре	49
2.4. Цилиндрический гониометр	52

2.5. Градусная сетка полуцилиндрической кристаллографической проекции	53
2.6. Диагностика рефлексов на цилиндрическом гониометре.....	58
ГЛАВА 3. ФОРМА НЕРАВНОВЕСНОГО КРИСТАЛЛА В ФИЗИЧЕСКОМ ПОЛЕ	65
3.1. Модель неравновесного роста кристалла.....	65
3.2. Характеристическая поверхность тензора устойчивости химических связей	67
3.3. Механический износ алмаза уральского типа	73
3.3.1. Упругие и пластические свойства кристаллов алмаза	74
3.3.2. Механизм течения кристалла алмаза при квазистатическом сжатии	77
3.3.3. Хаотический ударный износ кристалла	81
ГЛАВА 4. СТАТИСТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ, СОПРОВОЖДАЮЩИХ РОСТ И РАСТВОРЕНИЕ МАКРОКРИСТАЛЛА	89
4.1. Адсорбционные явления на поверхности грани кристалла	89
4.2. Функция распределения прироста вещества.....	94
4.3. Наблюдения дислокационного роста кристалла	99
4.4. Адсорбционно-флуктуационная модель растворения кристалла.....	103
4.5. Форма растворения алмаза	105
4.5. Иерархические уровни описания процессов, определяющих рост кристалла	108
ГЛАВА 5. МОРФОЛОГИЧЕСКОЕ РАЗНООБРАЗИЕ МНОГОГРАННИКОВ ДИНАМИЧЕСКОЙ ФОРМЫ КРИСТАЛЛОВ	112
5.1. Независимый рост граней.....	112
5.2. Вероятности нахождения идеальных кристаллографических многогранников в природе	120
5.3. Комбинаторные разновидности многогранников и расчет их вероятностей	128
5.4. Эволюция формы кристалла как марковский процесс	136
ГЛАВА 6. СИММЕТРИЙНЫЕ И ЭВОЛЮЦИОННЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ МНОГОГРАННИКОВ ДИНАМИЧЕСКОЙ ФОРМЫ	143
6.1. Кубические кристаллы.....	143
6.2. Тетрагональные кристаллы.....	144

6.3. Открытые тетрагональные пирамидально-призматические многогранники	151
6.4. Исчезающие и виртуальные грани многогранника	155
6.5. Природные кристаллы циркона	158
6.6. Обобщенные многогранники	162
6.6.1. <i>Тетрагонтриоктаэдр</i>	162
6.6.2. <i>Тетрагексаэдр</i>	165
6.6.3. <i>Пентагонтриоктаэдр</i>	167
6.6.4. <i>Гексоктаэдр</i>	169
6.7. Эффект полного ограничения	171
6.7.1. <i>Форма роста алмаза</i>	173
6.7.2. <i>Рост α-кварца</i>	174
6.7.3. <i>Метасоматический циркон</i>	175
6.7.4. <i>Растворяющийся алмаз</i>	176
6.7.5. <i>Тренды в эволюции формы кристалла в стационарном режиме</i>	176
ГЛАВА 7. ДИНАМИЧЕСКАЯ ФОРМА КРИСТАЛЛОВ КВАРЦА	181
7.1. Морфотипы головки α -кварца	181
7.2. Эмпирический коэффициент вариации центральных расстояний граней основных ромбоэдров	185
7.3. Вероятности полногранных морфотипов головки кварца	187
7.4. Морфологический анализ природных кристаллов кварца	192
7.5. Влияние гексагональной призмы на морфологические типы основных ромбоэдров	200
7.6. Переходные вероятности стационарного марковского процесса	203
7.7. Взаимосвязь морфологических параметров головки кварца	204
ГЛАВА 8. ПРИНЦИП СИММЕТРИИ КЮРИ В ОТКРЫТОЙ СИСТЕМЕ. ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО ОКРУЖЕНИЯ НА ФОРМУ КРИСТАЛЛА	206
8.1. Принцип симметрии-диссимметрии Кюри	206
8.2. Энтропия и симметрия	208
8.3. Эффект минимальной диссимметрии в термодинамической системе	213
8.3.1. <i>Минимальная диссимметрия в закрытой термодинамической системе</i>	214
8.3.2. <i>Форма равновесного кристалла в условиях гравитации</i>	217

8.3.3. Минимальная диссимметрия в открытой термодинамической системе	224
8.3.4. Гравитационное поле в открытой системе	227
8.3.5. Энтропия морфологического спектра растущего кристалла.....	231
8.3.6. Моделирование диссимметрии при росте кристалла	233
8.4. Диссимметрия питания кристаллов кварца	235
8.4.1. Варианты диссимметрии окружения.....	235
8.4.2. Условия полного ограничения	238
8.4.3. Общий случай динамической системы	242
8.5. Коллективный рост кристаллов и борьба за свободное пространство ...	246
8.5.1. Феноменология геометрического отбора	246
8.5.2. Математическая модель геометрического отбора	249
8.6. Искусственные алмазы, выращенные из металлических расплавов.....	254
8.7. Модель структуры мантийной породы и форма акцессорных алмазов..	259
8.7.1. Свойства мантийной гранулированной среды.....	260
8.7.2. Геометрия полиэдров, заполняющих пространство.....	263
8.7.3. Структура полиминеральной мантийной породы	265
8.7.4. Диссимметризация алмазов в мантии	269
8.7.5. Октаэдрические алмазы кимберлитовых трубок Саха (Якутии)	273
8.7.6. Возможный механизм кристаллизации природных октаэдрических алмазов	276
8.7.7. Диссимметрия октаэдрических алмазов как равновесных форм.....	278
8.8. Диссимметрия алмазов уральского типа	284
8.8.1. Комбинаторные разновидности округлого алмаза уральского типа.....	285
8.8.2. Эмпирический коэффициент вариации кратчайших расстояний.....	288
8.8.3. Факторы, определяющие растворение природных алмазов	290
8.8.4. Показатели диссимметрии алмазов уральского типа	298
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	304
CONCLUSION	310
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	315